

SEYFƏDDİN CƏFƏROV,  
FƏRMAN QOCAYEV  
Naxçıvan Dövlət Universiteti

## POLİMER-CdS NANOKOMPOZİTLƏRİNİN LOKAL ELEKTRON VƏ FƏZA QURULUSUNUN KVANT MEXANİKİ ÜSULLARLA TƏDQIQI

*Molekulyar mexanika və yarımpirik kvant mexanikası metodlarının tətbiqi ilə CdS nanokristallarının və onların polimerli komplekslərinin fəza elektron xüsusiyyətləri tədqiq edilmişdir. Polimerli nanohissəcik komplekslərinin və müxtəlif sayda atomlardan təşkil olunanmış nanoklasterlərin enerji parametrləri və elektron strukturunu müəyyən edən parametrləri təyin olunmuşdur. Həmçinin klaster və komplekslərin ümumi enerjisi, əlaqə enerjisi, elektron enerjisi, atom qruplarının itələmə enerjisi və yarıma enerjisi təyin edilmişdir. Alınmış nəticələr əsasında CdS nanohissəciklərinin polimer matrisində yerləşməsi ilə alınan nanokompozit strukturlarının lokal elektron və fəza quruluşları analiz edilmişdir.*

**Açar sözlər:** Polipropilen, nanokompozisiya, nanozərrəcik, energetik parametrlər, orbital enerji.

Təbii və süni polimerlər digər makromolekullardan kimyəvi tərkibinin coxsaylı təkrarlanması ilə fərqlənirlər. Polipropilen (PP) kimyəvi quruluşu ( $\text{CH}_2 = \text{CH}_2$ )n şəklində verilə bilənən süni polimerdir. Polipropilen  $\text{C}_2\text{H}_4$  kimyəvi quruluşuna malik propilenin polimeridir [1].  $\text{CH}_2$  metil qrupunun yerləşməsinə görə PP-nin bir neçə növü vardır və onlar fiziki xassələrinə görə bir-birindən fərqlənirlər. Ataktik PP-də  $\text{CH}_2$  qrupları molekulyar zəncir boyunca nizamsız yerləşmişlər. (sis və ya trans). İzotaktik PP-də metil qrupları yalnız molekulyar zəncirin bir tərəfində yerləşir (sis). İzotaktik PP ataktik PP-ə nəzərən 50% daha möhkəm, 25% daha bərkdir [2]. Sindotaktik PP-də metil qrupları molekulyar zəncirdə ciddi növbəli sağ-sol, qarşı-qarşısı (trans) yerləşmişlər. Sindotaktik PP şəffafdır və daha axıcıdır. PP bir qayda olaraq izotaktik və ataktik quruluşların qarışığı şəklində əldə edilir. PP-nin əsas xüsusiyyətlərindən biri onun termostoplast – qeyri-polyar olmasıdır. Sənayedə PP metalloorganik katalizatorların köməyi ilə əlaqə və orta təzyiqlərdə propilenin polimerləşdirilməsi yolu ilə əldə edilir. Polimerləşmə qeptan və ya benzin mühitində  $\text{TiCl}_3$  və Al ( $\text{C}_2\text{H}_5$ )<sub>2</sub> və ya Al ( $\text{C}_2\text{H}_5$ )<sub>3</sub> birləşmələrinin katalizatorluğu ilə 70-80°C və 2.7-3.0 MPa təzyiqlə baş verir [3, 4]. Hazır məhsulu məhluldan ayırmaq üçün mərkəzdənqayma qurğularından istifadə olunur. Texnoloji qaydalar tam riayət edildikdə əldə olunan material plastik , yüksək möhkəmiyyəli malik, zərbəyə və əyilməyə davamlı, kifayət qədər yüksək izolyator xassələrini geniş temperatur diapazonunda və fərqli kimyəvi mühitlərdə qoruyan material əldə edilir. Bu xassələr onu aşağı temperaturlarda həlledilməz edir. Yalnız güclü həlledicilərdə yüksək temperatur rejimində məhlulları alına bilər.

Polipropilen məişətdə və texnikada geniş istifadə edilən materialdır. Onun fiziki-kimyəvi faktorlara qarşı dayanıqlığı və qeyri-polyar olması izoləddici material kimi istifadə edilməsinə səbəb olduğu kimi həm də nanozərrəciklərin stabilizədirici örtüyünün əsas maddələrindən biri kimi də istifadəsini perspektivli edir.

Polimer nanokompozisiyaların əldə edilməsində polipropilenin istifadə praktikası

bu polimerin həm stabilizədirici, həm də nanohissəciklərin aqreqasiyası üçün əlverişli mühit təşkil etdiyini söyləməyə əsas verir. Nanohissəciklərin əmələ gəlməsi prosesinin tədricliliyi və məhlulun bütün hissələrində sinton baş verməsi nanohissəciklərin ölçü və tərkib bircinsliyi nöqtəyi-nəzərdən çox əhəmiyyətlidir.

Polimer nanokompozisiyalı materialların alınması və fiziki-kimyəvi xassələrinin tədqiqi nanotexnologiyanın əsas məsələlərindən biridir. Bu məsələləri həll edərkən çox-komponentli qarışıqların, valent, qeyri-valent komplekslərin meydana çıxmasını və stabilizəməsinə müəyyənlaşdırən amillərin müqayisəli analizi çox əhəmiyyətlidir. İdarə olunan və son nəticədə arzu edilən materialın alınmasını təmin edən uğurlu texnologiyanın işləni hazırlanması bundan asılıdır. Bu səbəbdən nanoöçülü quruluşların atom-molekul səviyyəsində öyrənilməsi çox vacibdir.

Təqdim edilən işdə PVDF və PP polimerləri matrisində kimyəvi üsullarla sintez edilən CdS nanozərrəcikli nanokompozisiyaların lokal fəza və elektron quruluşunun nəzəri metodlarla tədqiqinin nəticələri təqdim edilmişdir. Hesablamalar klaster yaranması əsasında aparılmışdır. Hesablama modelləri qurularək CdS və polimer komponentlərinin arasında kimyəvi rabitələrin olmadığı qəbul edilmişdir. CdS nanozərrəcikləri polimer mühitində Cd və S ionlarının xaosit miqyasıyasa nəticəsində meydana çıxdığı üçün onların formasının sferik quruluşu yaxın olduğu və yalnız daxili təbəqələrdə qismən nizamlı quruluşların makroskopik kristalın quruluş elementlərinə malik olduğu. Səthə yaxın bu nizamlılığın aradan qaldığı və səthdəki atomların nanohissəcik fəza quruluşunu sferaya təməmləmə meylinə malik olduğu qəbul edilmişdir. Molekulyar mexaniki hesablamalar vasitəsilə belə quruluşların atomların sıx qablaşdırılmasına əsasən stabilizəməsinin energetik xüsusiyyətləri analiz edilmişdir. Yarımpirik kvant-kimyəvi metodlar vasitəsilə sferanın daxili hissələrində və səthində quruluş vahidlərinin elektron buludunun paylanması və enerji səviyyələrinin quruluşu müqayisəli analiz edilmiş, polimerə daxil olan atomların onlara təsiri aydınlaşdırılmışdır. Müxtəlif saylı atomlardan ibarət CdS nanokristallarının polimer daxilində quruluşunu hesablamak üçün ilk növbədə polimer mühitlərdə nanokristalların fəza quruluşunda baş verən dəyişiklikləri nəzərə almaq üçün nanokristalların molekulyar mexaniki metodla həndəsi quruluşunun optimallaşdırılması aparılmışdır. Hər bir hesablama üçün həndəsi parametrlərin başlanğıc qiyməti uyğun nanokristallın kubik formasının koordinatları və atomlararası məsafəsi götürülmüşdür. Kristalın enerjisi qeyri-valent, rabitə uzunluqlarının və valent bucaqlarının deformasiya enerjilərinin cəmi şəklində götürülmüşdür. Ümumi enerjinin minimumlaşdırılması yolu ilə aşağı enerjili hala uyğun həndəsi parametrlər hesablanmışdır. Hesablama nəticələrinin düzgün kristallı müqayisəsi bütün hallarda səthə yaxın hissələrin daha köklü dəyişikliyə uğradığını göstərmişdir. Bu dəyişikliklər kubik quruluşlu nanokristalların səthinin sferik həndəsi formaya meyillənməsi istiqamətindədir. Nanokristalın daxili qatlarındakı atomlararası məsafələr demək olar ki, belə optimallaşma nəticəsində dəyişməmişdir. Həndəsi quruluşun bu şəkildə dəyişməsi və ümumi enerjinin azalmasını təmin etməsi damcı klaster modellərinə uyğun hesablamaların nəticələrinə uyğun gəlir. Nano-klasterlərin polimer mühitində həndəsi quruluşları ilə yanaşı elektron quruluşlarının da köklü şəkildə dəyişməyi sərbast və kompleksə daxil olmuş kristalların elektron orbital enerjilərinin və orbitaların məskunluğunun müqayisəli analizindən daha aydın görünür. Əgər sərbast nanoklasterlərin elektron quruluşunun səciyyəvi əlaməti olaraq onların simmetriyası ilə əlaqədar enerji səviyyələrinin zolaqlar şəklində yerləşməsi olduğunu nəzərə aldıqda, polimer daxilində bu zolaqların alt zolaqlara parçalandığı və ya tamamilə ayrı-ayrı səviyyəyə bölündüyü müşahidə olunur. Belə komplekslərdən birinin elektron quruluşunun energetik parametrləri və orbital enerjiləri cədvəl 1 və cədvəl 2-də verilmişdir.

**Polimer-CdS kompleksinin parametrləri (PM3)**

Enerji	
ETE	-295514.903
EBE	-22476.307
EIA	-273038.596
EHE	-6241714.155
ECC	5946199.251
EHF	7.897

Cədvəl 1

kompozit komplekslərində nanoklasterlərin enerji səviyyələrinin qruplarının ayrı-ayrı alt qruplara və enerji səviyyələrinə bölündüyü müşahidə edilmişdir. Nanoklasterlərin kompleksə daxil olduqda enerji səviyyəsinə edilən əlavələr səviyyələrin arasındakı məsafə və enerji zonasının enini dəyişsə də səviyyələrin sıralanma ardıcılığını dəyişməmişdir.

**ƏDƏBİYYAT**

1. Məhərrəmov A.M., Ramazanov M.Ə., Vəliyeva L.I. Nanotexnologiya. Bakı: Çaşıoğlu, 2007. 232 s.
2. Muxtarova A.I. Kvant mexanikası. Bakı: BDU nəşriyyatı, 2007. 660 s.
3. Nəbiyev N.S. Yarımpirik kvant kimyevi metodlar. Bakı: BDU nəşriyyatı, 2000. 268 s.
4. Губанов В.А. Полуэмпирические методы молекулярных орбиталей в квантовой химии. Москва: Наука, 1983. 270 с.

Cədvəl 2

**Polimer-CdS kompleksinin enerjisi və məskunlaşma əmsalı**

N <sub>ə</sub>	Orbital enerji	Məskunlaşma əmsalı
1	-44.882	0.680
2	-43.457	0.012
3	-42.321	0.015
4	-42.113	0.017
5	-41.478	1.956
6	-41.430	1.777
7	-40.418	1.762
8	-39.831	1.783
9	-39.445	0.702
10	-38.796	0.012
11	-38.096	0.014
12	-37.419	0.017
13	-36.688	1.955
14	-36.301	1.775
15	-35.237	1.768
16	-35.048	1.770
17	-34.151	1.956
18	-34.113	1.757
19	-33.205	1.779
20	-32.737	1.758
21	-32.159	0.714
22	-31.964	0.016
23	-31.350	0.011
24	-31.224	0.012

**Сейфаддин Джафаров, Ферман Годжаев**

**ИССЛЕДОВАНИЕ ЛОКАЛЬНО-ЭЛЕКТРОННОЙ И ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ НАНОКОМПОЗИТОВ ПОЛИМЕР-CdS КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИМ МЕТОДОМ**

Методом молекулярной механики и полуэмпирической квантовой механики исследованы пространственные электронные особенности нанокластеров CdS и их комплексов с полимерами. Определены энергетические параметры и параметры, определяющие электронную структуру нанокластеров, состоящих из разного числа атомов и комплексов наночастиц с полимерами. Также определена общая энергия, энергия связывания, электронная энергия, энергия отталкивания атомных составов и теплоты с образованием кластеров и комплексов. На основе полученных результатов анализируются особенности локальных электронных и пространственных структур нанокомпозитов, полученных внедрением наночастиц CdS в полимерных матрицах.

**Ключевые слова:** полипропилен, нанокмпозиция, наночастица, энергетический параметр, орбитальная энергия.

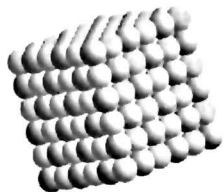
**Seifaddin Jafarov, Farman Gojayev**

**INVESTIGATION OF THE LOCAL-ELECTRON AND SPATIAL STRUCTURE OF POLYMER-CdS NANOCOMPOSITES BY THE QUANTUM-MECHANICAL METHOD**

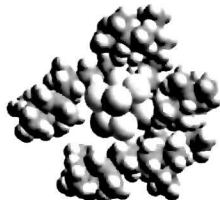
By the method of molecular mechanics and semiempirical quantum mechanics, the spatial electronic features of CdS nanoclusters and their complexes with polymers are investigated. The energy parameters and parameters determining the electronic structure of nanoclusters consisting of different numbers of atoms and complexes of nanoparticles with polymers are determined. The total energy, binding energy, electron energy, repulsive energy of atomic structures and heat with formation of clusters and complexes are also determined. Based on the obtained results, the features of local electronic and spatial structures of nanocomposites obtained by introducing CdS nanoparticles in polymer matrices are analyzed.

**Keywords:** polypropylene, nanocomposite, nanoparticle, energy parameter, orbital energy.

(AMEA-nun müxbir üzvü Vəli Hüseynov tərəfindən təqdim edilmişdir)



Şəkil 1. 216 atomdan ibarət CdS nanokristalı



Şəkil 2. Polimer-CdS nanokristalı kompleksi

Aparılan hesablamaların nəticələri sərbəst nanoklasterlərin enerji səviyyələrinin ayrı-ayrı qruplardan ibarət olduğunu göstərmişdir. Bu qrupları təşkil edən enerjisi səviyyələrinin sayı nanoklasterlərin simmetriya xüsusiyyətləri ilə təyin edilir. Polimer-nano-